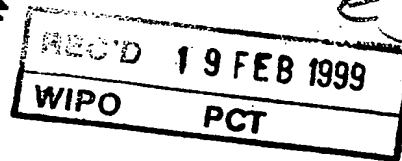


BUNDE REPUBLIK DEUTSCHLAND**PRIORITY
DOCUMENT**SUBMITTED OR TRANSMITTED IN
COMPLIANCE WITH RULE 17.1(a) OR (b)

EP 98/08214

Bescheinigung

Die Studiengesellschaft Kohle mbH in Mülheim an der Ruhr/
Deutschland hat eine Patentanmeldung unter der Bezeichnung

"Verfahren zur kombinatorischen Katalysatorent-
wicklung durch den Einsatz von Wärmedifferenzbil-
dern"

am 23. Dezember 1997 beim Deutschen Patent- und Markenamt
eingereicht.

Die angehefteten Stücke sind eine richtige und genaue
Wiedergabe der ursprünglichen Unterlagen dieser Patent-
anmeldung.

Die Anmeldung hat im Deutschen Patent- und Markenamt vor-
läufig die Symbole B 01 J und G 01 N der Internationalen
Patentklassifikation erhalten.

München, den 1. Dezember 1998
Deutsches Patent- und Markenamt

Der Präsident

Im Auftrag

*C. Wehner*Aktenzeichen: 197 57 754.7

Wehner

Verfahren zur kombinatorischen Katalysatorentwicklung durch den Einsatz von Wärmedifferenzbildern

Die Erfindung betrifft die Herstellung von Katalysatorbibliotheken mit Hilfe des Sol-Gel-Verfahrens und die Aufnahme von Wärmedifferenzbildern mit einer Infrarot-Kamera zur Registrierung der katalytischen Aktivität der Katalysatoren.

Trotz der weitverbreiteten Anwendung heterogener Katalysatoren in der chemischen Technik und diesbezüglicher umfangreicher Forschungsbemühungen ist der Mechanismus der Wirkungsweise heterogener Katalysatoren unter technischen Reaktionsbedingungen bis heute nur unzureichend bekannt. Man ist deshalb auf empirische Verfahren angewiesen, um für jede Anwendung die richtigen Katalysatormaterialien auszuwählen und Reaktionsbedingungen zu finden, unter denen die gewünschte katalytische Aktivität auftritt. Klassische Testverfahren für heterogene Katalysatoren erfordern, daß jedes in Frage kommende Katalysatormaterial einzeln unter Reaktionsbedingungen getestet wird, was angesichts der unübersehbaren Fülle in Frage kommender Materialien eine sehr kostspielige und zugleich zeitraubende Verfahrensweise darstellt. Einen vielversprechenden Ausweg bietet hier das Gebiet der kombinatorischen Materialwissenschaften, um für technisch interessante Reaktionen eine sinnvolle Vorauswahl in Frage kommender heterogener Katalysatormaterialien zu treffen und das Testverfahren auf wenige aussichtsreiche Materialien zu beschränken.

Bei den als kombinatorische Methoden bezeichneten Verfahren wird auf einem Träger auf engstem Raum eine große Anzahl von Proben angebracht. An Hand leicht zugänglicher physikalischer Meßgrößen, die im Zusammenhang mit der erwünschten Eigenschaft des Materials stehen, wird dann an jeder Probe ein schneller und zuverlässiger Test auf die gewünschte Eigenschaft durchgeführt.

Auf diese Weise wurden bereits neue magnetoresistente Materialien [B. Gabriel, H. Chang, X. Sun, P. G. Schultz, X.-D. Xiang, "A Class of Cobalt Oxide Magnetoresistance Materials Discovered with Combinatorial Synthesis",

Science, 270, 273-275, 1995], neue supraleitende Materialien [X.-D. Xiang, X. Sun, G. Briceno, Y. Lou, K.-A. Wang, H. Chang, W. G. Wallace-Freedman, S.-W. Chen, P. G. Schultz, "A combinatorial Approach to Materials Discovery", Science, 268, 1738-1740, 1995] und neue lumineszente Materialien [X.-D. Sun, K.-A. Wang, Y. Yoo, W. G. Wallace-Freedman, C. Gao, X.-D. Xiang, P. G. Schultz, "Solution-Phase Synthesis of Luminescent Materials Libraries", Adv. Mater. 9, 1046-1049, 1997] entdeckt.

Auch auf dem Gebiet der kombinatorischen Chemie heterogener Katalysatoren gibt es bereits eine entsprechende Veröffentlichung [F. C. Moates, M. Somani, J. Annamalai, J. T. Richardson, D. Luss, R. C. Willson, "Infrared Thermographic Screening of Combinatorial Libraries of Heterogeneous Catalysts", Ind. Eng. Chem. Res. 35, 4801-4803, 1996; R. C. Willson, "Catalyst Testing Process and Apparatus" US-Patent: PCT/US97/02756 Internationales Patent: WO 97/32208]. Die Autoren beschreiben ein Experiment, bei dem mit Hilfe einer Infrarot-Kamera katalytische Aktivität anhand der dabei auftretenden Wärmetönung detektiert wird. Die Detektionsempfindlichkeit des von den Autoren beschriebenen Aufbaus war allerdings relativ gering, so daß nur die extrem exotherme Knallgasreaktion (14 kJ/g) detektiert wurde. Es handelt sich hierbei nicht um eine Reaktion von technischer Bedeutung. Um effektiv Katalysatoren für technisch wichtige Reaktionen zu untersuchen, ist vor allem eine höhere Detektionsempfindlichkeit des Meßaufbaus nötig, und es muß der Nachweis geführt werden, daß Reaktionswärmen bei niedrigeren Temperaturen, unterschiedlichen Reaktionen und mit winzigsten Katalysatormengen möglich ist.

Da die Intensität der Infrarotstrahlung unterschiedlicher Materialien bei identischer Temperatur aufgrund der unterschiedlichen Emissionseigenschaften unterschiedlich ist, zeigen hoch empfindliche IR-Kameras die Anwesenheit unterschiedlicher Materialien auf einer Oberfläche im IR-Bild, auch ohne daß Reaktionen ablaufen, wodurch die praktische Anwendbarkeit dieser Methode stark eingeschränkt ist.

Die zuverlässige Herstellung von Katalysatorbibliotheken ist ein weiterer wichtiger Aspekt. Bekannt sind kombinatorische Bibliotheken, die sich zwar weitgehend auf den Bereich der pharmazeutischen Anwendung beschränken, sich aber zum Teil auch auf die Herstellung von Bibliotheken für die Entwicklung neuer Materialien übertragen lassen (B. Posner et. al, Trends in Biochemical Science 19 (1994) 145). Die wohl zuverlässigste und breit einsetzbare Methode zur Herstellung kombinatorischer Bibliotheken von Materialien ist die Kombination von Ink-Jet-Druckertechnologie mit Computersteuerung, welche erlaubt, die neuen Materialien punktweise durch Mischung von Lösungen im Nanoliterbereich zu erzeugen und durch gezielte Nachbehandlung in die zu untersuchenden Feststoffe umzuwandeln [X.-D. Sun, K.-A. Wang, Y. Yoo, W. G. Wallace-Freedman, C. Gao, X.-D. Xiang, P. G. Schultz, "Solution-Phase Synthesis of Luminescent Materials Libraries", Adv. Mater. 9, 1046-1049, 1997]. Das Problem ist hier jedoch der Einsatz geeigneter Synthesebedingungen, die es erlauben, mit diesen vermischten Nanoliterlösungen auch definierte Katalysator- und andere Materialien zu erzeugen.

Wir haben nun gefunden, daß überraschenderweise das Sol-Gel-Verfahren, wie es zum Teil in DE-A 195.45042.6 beschrieben wurde, sich ausgezeichnet für die Herstellung von Katalysatorbibliotheken eignet und daß die Reaktionswärmen kleinster Katalysatormengen solcher Bibliotheken orts aufgelöst mit einer Infrarot-Kamera zuverlässig sichtbar gemacht werden können, wenn ein Differenzwärmebild registriert wird, das sich aus der Subtraktion der vor Reaktionsbeginn registrierten IR-Emissionsintensitäten von den unter Reaktionsbedingungen erhaltenen Intensitäten ergibt. Dies ist mit modernen IR-Kameras und geeigneter Computer-Software leicht routinemäßig durchführbar.

Bevorzugt werden die katalytischen Reaktionen unter genau kontrollierten Bedingungen in einem hermetisch verschlossenen Reaktor durchgeführt, der mit einem IR-durchlässigen Fenster versehen ist, um das Registrieren mit der Kamera zu ermöglichen.

Das erfindungsgemäße Verfahren zur Herstellung von Katalysatorbibliotheken, bestehend aus Katalysatorkomponenten in Form von Metalloxiden und/oder Metallmischoxiden, nach dem Sol-Gel-Verfahren ist dadurch gekennzeichnet, daß die Vorstufen der zu untersuchenden Katalysatorkomponenten als wässrige oder alkoholische Lösung von Silizium- oder Metallverbindungen in Form ihrer Alkoxyderivate, gemischten Alkoxyderivate, ihrer Alkoxyoxo- oder Acetylacetonatderivate oder in Form ihrer Halogenide, Nitrate, Citrate oder andere Carboxylate über die Fläche einer Platte, die z. B. aus Metall oder Stahl, Glas, Keramik oder Kunststoff besteht, verteilt angeordnet werden, z. B. in durch Bohrungen in der Platte entstandenen Mulden. Bei den Katalysatorkomponenten kann es sich insbesondere um Carbide, Nitride und Zeolite handeln. Die Bibliotheksplatten werden anschließend getrocknet und kalziniert. Um ein günstiges Signal/Rausch-Verhältnis der IR-Emission zu erhalten, stellt man diese Platten bevorzugt aus Material mit niedriger IR-Emission her, z. B. aus V4A-Stahl.

Unsere Untersuchungen haben gezeigt, daß es durch die Anwendung von Differenzwärmebildern möglich ist, katalytische Aktivität für technisch interessante Reaktionen kleinster Katalysatormengen, wie Hydrierungen und Oxidationen von Kohlenwasserstoffen, auf einer Bibliothek simultan sichtbar zu machen und damit katalytisch aktive Materialien aus einer großen Gruppe einfach und zeitsparend zu erkennen und auszuwählen. Das Verfahren ist natürlich auf viele andere Reaktionstypen, wie selektive Hydrierungen, selektive Oxidationen, Veresterungen, pericyclische Reaktionen, Halogenierungen, Dehalogenierungen, Hydrogenolysen, Hydratisierungen, Dehydratisierungen, Kondensationen, enantioselektive Reaktionen, Polymerisationsreaktionen, Polykondensationsreaktionen, oxidative Kupplungen, und selektive Oxidationen von Olefinen und Alkanen, insbesondere mit Luft, H_2O_2 oder Ozon unter selektiver Bildung von Epoxiden, Ketonen, Aldehyden, Alkoholen, Carbonsäuren oder Anhydriden anwendbar. Auch Reaktionswärmen solcher Reaktionen in flüssiger Phase können damit sichtbar gemacht werden.

Auch andere Phänomene können mit dem Verfahren verfolgt werden: Zum Beispiel die Wärmetönung der Absorption zur Erkennung von Porosität, die Wärmetönung von Phasenumwandlungen zur Erkennung von Stoffänderungen, oder die Wärmetönung verbunden mit Oberflächenreaktionen, wie der Bildung von Carbiden oder Nitriden durch Reaktionen mit Methan oder Ammoniak.

Beispiele:

Die Katalysatormaterialien wurden mit Hilfe einer naßchemischen Methode auf eine Platte aufgebracht, in der sich Bohrungen zur Aufnahme der Flüssigkeit befinden. Die Platte wurde in einen Reaktor eingebracht, der mit einer Heizung und einem Thermoelement versehen war. Durch eine Regeleinheit war es möglich über das Thermoelement die Temperatur an der Platte mit den Katalysatorproben zu messen und über die Heizung mit Regler auf einem konstanten Wert zu halten.

Oberhalb des Reaktors wurde die Infrarot-Kamera angebracht. Durch ein im Deckel des Reaktors eingesetztes Fenster war die Beobachtung der Platte möglich. Die infolge katalytischer Aktivität auftretende Wärmetönung wurde anhand der sich dabei verändernden Infrarotemission durch die Kamera beobachtet.

Zur Herstellung der Katalysatorbibliotheken:

Für die Katalysatorbibliotheken wurden Platten aus V4A-Stahl benutzt, nachdem vergleichende Tests mit Platten aus u. a. Glas, Aluminium, Bronze, Keramik weniger gute IR-Bilder ergaben. Die Katalysatorbibliotheken wurden dadurch hergestellt, daß die vorgebohrten Mulden von speziell hergestellten Tüpfelplatten mit winzigen Mengen von Katalysator-Solen gefüllt wurden.

Es wurden jeweils 0.3 µl verschiedener Sole aus Mischoxiden, die jeweils aus zwei verschiedenen Oxiden bestehen mit einer Eppendorf-Pipette in Bohrungen auf einer Platte von 5 mm Dicke und einer Größe von 7x5 cm V4A-Stahl (Bohrungen: 0,1- 1.5 mm Durchmesser und 0.1-1 mm Tiefe) einpipettiert

und das Lösungsmittel verdunstet. Nach dem Verdunsten des Lösungsmittels wurde die Platte mit einem bestimmten Temperaturprogramm (1. Raumtemperatur bis 65 °C mit 1 °C/min, 2. Temperatur 30 min bei 65 °C halten, 3. 65 °C bis 250 °C mit 1 °C/min, 4. Temperatur 3h bei 250 °C halten, 5. auf Raumtemperatur abkühlen) kalziniert. Die so entstandenen Katalysatoren bestehen zum überwiegenden Teil (95-99 mol%) aus Siliziumdioxid oder Titandioxid oder Zirkoniumdioxid und einem geringeren Anteil (1-5 mol%) aus einer katalytisch aktiven Komponente wie z. B. Platin, Palladium, Rhodium, Chrom, Cobalt, Mangan, Ruthenium, Gold, Silber, Nickel, Zirkonium, Iridium, Kupfer oder Zink. Tabelle 1 zeigt die Belegung der Bibliothek.

Die Katalysatorbibliothek wurde zur Aktivierung der katalytisch aktiven Zentren vor dem Experiment mit Wasserstoff bei 250 °C 3 h lang reduziert.

Reaktor:

Der Reaktor bestand aus einem zylinderförmigen Gefäß mit einem Inhalt von etwa 3l der mit einem abschraubbaren Deckel verschlossen war. Der Deckel enthielt ein für Infrarotstrahlung durchlässiges Fenster aus optisch geschliffenem Bariumfluorid. Das Fenster war so angebracht, daß die von der Platte mit den Katalysatorproben ausgesandte Strahlung durch die senkrecht oberhalb des Reaktors angebrachte Kamera eingefangen werden konnte. Das Fenster hatte gegenüber der Grundfläche des Reaktors einen Neigungswinkel von 10°. Diese Neigung verhindert, daß eventuell störende Reflexionen an der Oberfläche des Fensters von der Kamera eingefangen werden und so zur Verfälschung des Meßsignals beitragen. Weiterhin waren an dem Reaktor Gasanschlüsse angebracht, durch die verschiedene Gase zu- und abgeführt werden konnten. Die Menge der zugeführten Gase wurde dabei mit Hilfe von Durchflußreglern auf einem vorgegebenen Wert gehalten. Die für die katalytische Reaktion notwendigen organischen Verbindungen lagen in flüssiger Form vor und wurden durch Anreicherung des dem Reaktor zufließenden Gasstromes dem Reaktor zugeführt.

Kamera:

Es wurde eine Infrarot-Kamera der Firma AEG des Typs AEGALS verwendet mit einem PtSi- (Platin-Silizium) Detektor mit 256 mal 256 Bildpunkten. Die Kamera war an einen Computer angeschlossen. Die Software (Version 1.40 vom 4.7.97) erlaubte, den Hintergrund so abzuziehen, daß an jedem Bildpunkt nur eine Temperaturerhöhung relativ zur Ausgangstemperatur angezeigt wird. Dies ist besonders wichtig, da aufgrund der Empfindlichkeit des Versuchsaufbaus Inhomogenitäten der Temperaturverteilung sowie die verschiedenen Emissivitäten von Unterlage und Katalysatormaterialien leicht zu einer falschen Interpretation der Ergebnisse führen können.

Da die hier durchgeführten Messungen eine besonders hohe Empfindlichkeit erfordern, mußten die vorhandenen - wenn auch geringen - Unterschiede in der Empfindlichkeit der Einzeldetektoren des Array-Detektors korrigiert werden. Dies geschah durch Kalibriermessungen bei unterschiedlichen Temperaturen. Die Entfernung der Kamera von der Katalysatorbibliothek betrug mit einem Objektiv mit 50 mm Brennweite ca. 55 cm.

Mit dieser IR-Kamera wurden nun unsere Katalysatorbibliotheken getestet. Als technisch wichtige und repräsentative Reaktionen haben wir eine Hydrierung und eine Oxidation von Kohlenwasserstoffen ausgewählt. Vor der Messung wurden IR-Aufnahmen der Katalysatorbibliothek bei 80°C unter Wasserstoffatmosphäre (Hydrierung von 1-Hexin) bzw. bei 180°C unter einer Atmosphäre von synthetischer Luft (Oxidation von Isooctan) als Referenzhintergrund eingelesen, der in der Differenzbilddarstellung nur noch als konturloses einfarbiges Bild erscheint.

Beispiel 1: Hydrierung von 1-Hexin

Wie oben beschrieben, wurde eine polierte V4A-Stahlplatte mit Katalysator-Proben präpariert und dann im oben beschriebenen Reaktor in einem Wasserstoffstrom von 100 ml/min auf eine Temperatur von 80°C gebracht.

Danach wurde 1-Hexin zum Wasserstoff zudosiert und diese Reaktionsmischung wurde mit konstanter Strömungsgeschwindigkeit bei 80 °C über die Bibliothek geleitet. Die Konzentration des 1-Hexins wurde dabei auf 5,6 Vol% gehalten, die zu erwartende Reaktionswärme dieser Hydrierreaktion beträgt nur 3 kJ/g equimolarer Reaktionsmischung und nur ca. 0,6 kJ/Liter der eingesetzten Gasphasenmischung. Trotz dieser geringen Reaktionsmenge zeigte das Differenzwärmebild selektiv eine Temperaturänderung an bestimmten Katalysatorpunkten. Abbildung 2 zeigt ein solches Differenzwärmebild. (Bedingt durch statistische Schwankungen unter den Reaktionsbedingungen sind mit geringer Intensität auch unbesetzte Mulden auf dem Bild erkennbar.) Daraus folgt, daß vor allem die Katalysatormaterialien $\text{Pd}_5(\text{SiO}_2)_{95}$, $\text{Rh}_3(\text{TiO}_2)_{97}$, $\text{Ru}_3(\text{TiO}_2)_{97}$, $\text{Pt}_5(\text{SiO}_2)_{95}$ unter diesen Reaktionsbedingungen besonders hydrieraktiv sind.

Beispiel 2: Oxidation von Isooctan

Die gleiche Katalysatorbibliothek wurde nun auf Oxidationsaktivität mit Luft als Oxidationsmittel und Isooctan als Reagens untersucht. Es ist bekannt, daß katalytische Oxidation mit guten Pt- und Pd-haltigen Katalysatoren bei Temperaturen > 200 °C effektiv verläuft. Um Anfangsaktivitäten erkennen zu können, wurde eine Reaktionstemperatur von nur 180 °C ausgewählt. Der Reaktionsraum der Bibliothek wurde mit synthetischer Luft (100 ml/min) kontinuierlich durchströmt und auf 180 °C thermostatisiert. Da die IR-Strahlung bei 180 °C bereits so stark ist, daß empfindliche Detektoren, wie der von uns verwendete PtSi-Array-Detektor bereits von der Grundstrahlung gesättigt werden, wurde zur Beobachtung ein IR-Breitbandfilter eingesetzt. Der verwendete IR-Filter (L.O.T. Oriel, IR ND O.D.=1.0) filtert 90% der gesamten IR-Strahlung heraus. Der Filter wurde auf das Bariumfluorid-Fenster des Reaktors aufgelegt. Nun wurde das Hintergrundbild bei 180 °C aufgezeichnet. Danach wurde Isooctan (1,1 Vol%) der synthetischen Luft zudosiert. Die mögliche Reaktionswärme betrüge bei vollständiger Verbrennung zu CO_2 immerhin 13 kJ/g equimolares Reaktionsgemisch, bei unserer Anordnung jedoch nur 0,7 kJ/l Gasphasengemisch, so daß die maximale Reaktionswärme mit der der Hydrierung vergleichbar war. Trotz 90%iger Abschwächung des Wärmesignals

14 15 12 99

9

war eine eindeutige Wärmetönung selektiv an einem der Katalysatorsports erkennbar (siehe Abb. 3). Daraus kann man schließen, daß unter diesen Bedingungen das Katalysatormaterial $\text{Pt}_5(\text{SiO}_2)_{95}$ besondere katalytische Aktivität zeigt.

Patentansprüche

1. Verfahren zur Herstellung von Katalysatorbibliotheken, bestehend aus Katalysatorkomponenten in Form von Metalloxiden und/oder Metallmischoxiden, dadurch gekennzeichnet, daß deren Vorstufen als wässrige oder alkoholische Lösungen von Silizium- oder Metallverbindungen in Form ihrer Alkoxyderivate, gemischter Alkoxyderivate, ihrer Alkoxyoxo- oder Acetylacetonatderivate oder in Form ihrer Halogenide, Nitrate, Citrate oder andere Carboxylate über die Fläche einer Bibliotheksplatte, im wesentlichen bestehend aus Metall, Stahl, Glas, Keramik oder Kunststoff, angeordnet werden, mit anschließendem Trocknen und Kalzinieren.
2. Verfahren nach Anspruch 1, wobei es sich bei den Katalysatorkomponenten um Carbide, Nitride oder Zeolite handelt.
3. Verfahren nach Anspruch 1-2, wobei die Bibliotheksplatte aus einem Material geringer Infrarot-Emission besteht.
4. Verfahren nach Anspruch 3, wobei die Bibliotheksplatte aus poliertem V4A-Stahl besteht.
5. Verfahren zur vergleichenden Bestimmung der katalytischen Aktivität von Katalysatoren, dadurch gekennzeichnet, daß mit Hilfe einer IR-Kamera das Differenzbild registriert wird, das sich aus der Subtraktion der IR-Emission der über eine Fläche angeordneten Katalysatoren vor der katalytischen Reaktion von der IR-Emission während der Durchführung der Reaktion ergibt.
6. Verfahren nach Anspruch 5, dadurch gekennzeichnet, daß die Katalysatoren in gemäß Anspruch 1-4 hergestellten Katalysatorbibliotheken untergebracht sind.
7. Verfahren nach Anspruch 5-6, wobei sich die Katalysatoren unter Reaktionsbedingungen in dem Reaktor befindet und von einer extern angeordneten IR-Kamera durch eine IR-durchlässiges Fenster aufgenommen wird.

M 15 12 98

11

Zusammenfassung

Verfahren zur Herstellung von Katalysatorbibliotheken zur kombinatorischen Entwicklung heterogener Katalysatoren mit Hilfe des Sol-Gel-Verfahrens und zur vergleichenden Bestimmung der katalytischen Aktivität der auf einer Platte angeordneten Katalysatoren über deren IR-Emission während der Reaktion mit Hilfe von Wärmedifferenzbildern einer Infrarot-Kamera.

M 15.10.98

				$\text{Ni}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Rh}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Fe}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Ir}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$
			$\text{Pd}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Pt}_1(\text{TiO}_2)_{99}$	$\text{Pd}_5(\text{SiO}_2)_9$	$\text{Rh}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Ag}_3(\text{TiO}_2)_{97}$
		$\text{Pd}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Ti}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Cu}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Cr}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Co}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Pd}_3(\text{TiO}_2)_{97}$
			$\text{Co}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Mn}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Mn}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Ru}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Cu}_3(\text{TiO}_2)_{97}$
		$\text{Ag}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Pt}_4(\text{TiO}_2)_{96}$	$\text{Pt}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Ir}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Pt}_5(\text{SiO}_2)_{95}$	$\text{Au}_3(\text{TiO}_2)_{97}$
			$\text{Fe}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Pt}_5(\text{SiO}_2)_{95}$	$\text{Zr}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Ni}_3(\text{TiO}_2)_{97}$	$\text{Pt}_4(\text{TiO}_2)_{96}$
				$\text{Au}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Pd}_5(\text{SiO}_2)_{95}$	$\text{Ru}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$	$\text{Zn}_3(\text{ZrO}_2)_{97}$

Tabelle 1:

Belegung der Katalysatorbibliothek von Abbildung 1 bis 3
 (Katalysatormenge pro Feld: $0,3 \mu\text{l Sol} = 0,001 \text{ mmol Metalloxid}$. $\text{Pt}_5(\text{SiO}_2)_{95}$
 entspricht also einem Pt-Gehalt von $0,00005 \text{ mmol} = 0,05 \mu\text{mol Pt}$)

M 15.12.98

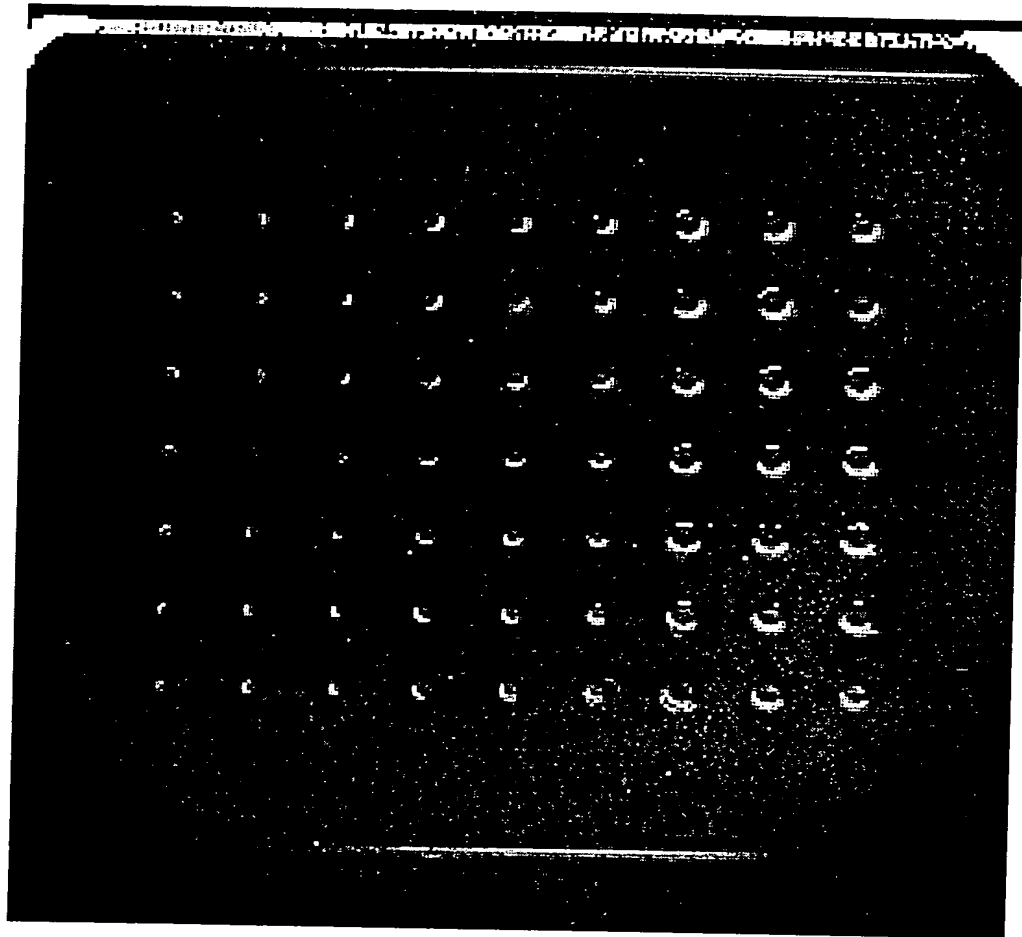


Abbildung 1/3:
IR-Bild einer Katalysatorbibliothek ohne Reaktion, alle Punkte auf der
Oberfläche haben die gleiche Absoluttemperatur.

14 15 12 99

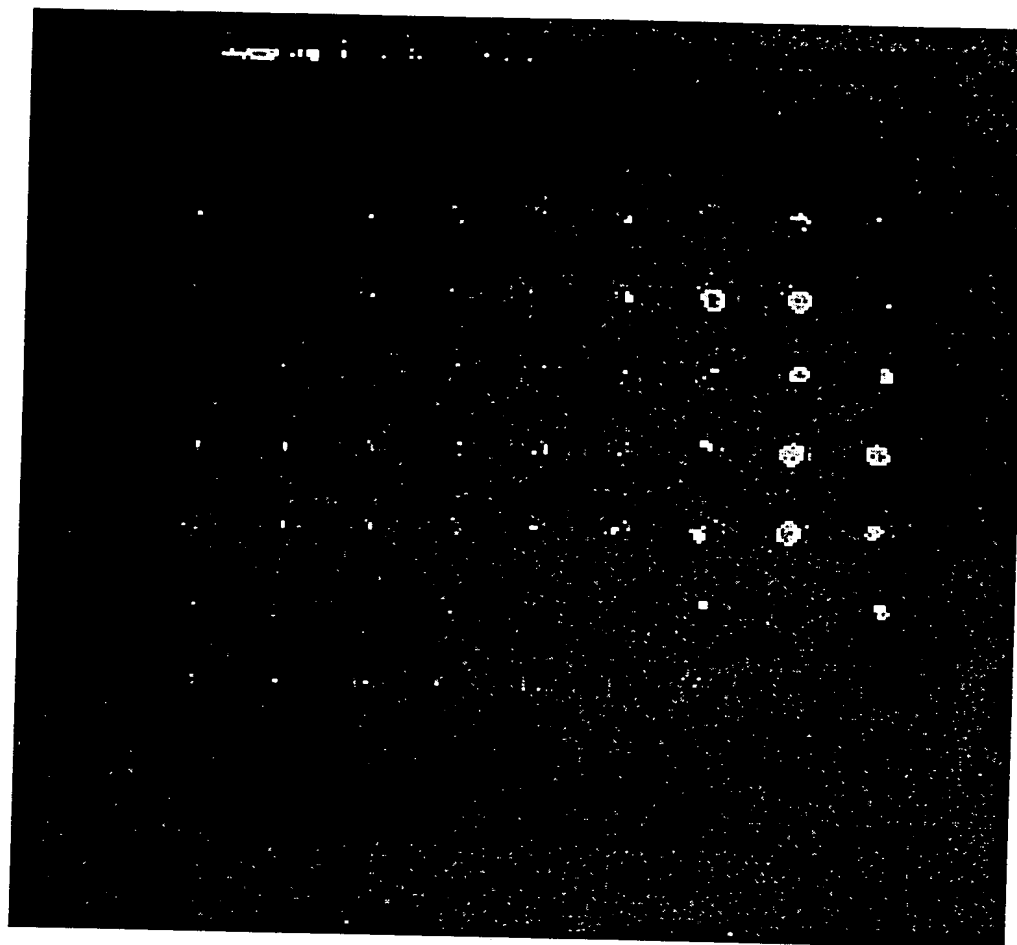


Abbildung 2/3:

IR-Wärmedifferenzbild während der Hydrierung von 1-Hexin bei 80 °C.
 $\text{Pd}_5(\text{SiO}_2)_{95}$, $\text{Rh}_3(\text{TiO}_2)_{97}$, $\text{Ru}_3(\text{TiO}_2)_{97}$, $\text{Pt}_5(\text{SiO}_2)_{95}$ sind besonders hydrieraktiv.

14 15 12 98

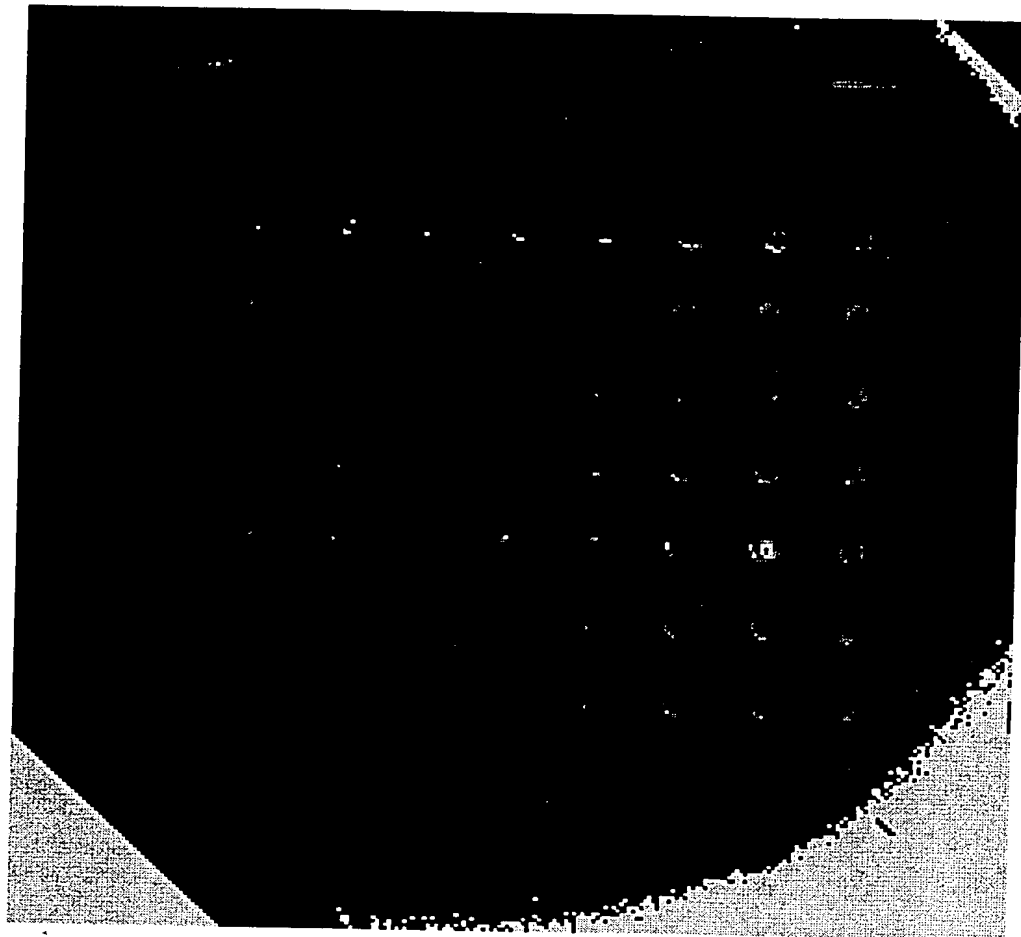


Abbildung 3/3:
IR-Wärmedifferenzbild während der Oxidation von Isooctan bei 180 °C.
 $\text{Pt}_5(\text{SiO}_2)_{95}$ zeigt hierbei besondere katalytische Aktivität.